

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ДВНЗ «ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА»**

**СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Сучасні матеріали для енергетики**

Освітньо-наукова програма 104 «Фізика та астрономія»

Освітній рівень третій (освітньо-науковий)

Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»

Галузь знань 10 «Природничі науки»

Затверджено на засіданні  
кафедри фізики і хімії твердого тіла  
Протокол № 1 від “26” серпня 2021 р.

м. Івано-Франківськ - 2021

## ЗМІСТ

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Компетентності
5. Результати навчання
6. Організація навчання курсу
7. Система оцінювання курсу
8. Політика курсу
9. Рекомендована література

<b>1. Загальна інформація</b>	
<b>Назва дисципліни</b>	<b>Сучасні матеріали для енергетики</b>
<b>Рівень вищої освіти</b>	Доктор філософії
<b>Викладач (-і)</b>	Никируй Любомир Іванович – кандидат фізико-математичних наук, професор кафедри фізики і хімії твердого тіла
<b>Контактний телефон викладача</b>	+380956991785
<b>E-mail викладача</b>	<a href="mailto:lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua">lyubomyr.nykyruy@pnu.edu.ua</a>
<b>Формат дисципліни</b>	Очний
<b>Обсяг дисципліни</b>	3 кредити ECTS, 90 год.
<b>Посилання на сайт дистанційного навчання</b>	<a href="http://www.d-learn.pu.if.ua">http://www.d-learn.pu.if.ua</a>
<b>Консультації</b>	
<b>2. Анотація до курсу</b>	
<p>Дисципліна «Сучасні матеріали для енергетики» є дисципліною за вибором для спеціальності 104 Фізика та астрономія для третього (доктор філософії) освітньо-наукового рівня вищої освіти, яка викладається в 3 семестрі в обсязі 3 кредити (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Зміст та матеріал навчальної дисципліни стосується аналізу сучасних проблем у розрахункових методах у галузі фізики, який орієнтує на актуальні питання та можливості моделювання структури та властивостей матеріалів, в рамках яких можлива подальша професійна та наукова кар'єра у галузі фізики та астрономії. На даному курсі аспіранти поглиблюють теоретичні знання теоретичних основ, а також практичні навички застосування методів звичайного і залежного від часу функціоналу електронної густини для розрахунків електронної структури і динамічних властивостей матеріалів, засвоюють основи роботи у прикладних програмних пакетах GAMESS US, Wien 2k, Vurati та програмах обробки / аналізу розрахованих значень (Avogadro, Chemcraft, GaussSum, Molden, Xcrysden, тощо).</p> <p>Для вивчення курсу аспіранти повинні знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики, квантової механіки, фізики твердого тіла; вміти застосовувати набуті раніше знання з курсів математичного аналізу, диференційних рівнянь, методів математичної фізики, загальної фізики, квантової механіки, статистичної фізики, фізики твердого тіла та комп'ютерних технологій для розв'язку практичних завдань; володіти навичками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв'язку алгебраїчних і диференційних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.</p>	
<b>3. Мета та цілі курсу</b>	
<p>Мета курсу: Оволодіння основними фундаментальними уявленнями про сучасні методики розрахунків та принципи моделювання у галузі фізики та астрономії, а також формування в аспірантів вмінь та навичок практичної роботи для розв'язання проблемних завдань.</p> <p>Завдання курсу:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>✓ обґрунтування необхідності переформулювання багаточасткової квантово-механічної задачі на мові одночастинкової теорії;</li> <li>✓ введення поняття густини електронних станів як фундаментальної характеристики квантово-механічної системи;</li> <li>✓ знайомство з математичним апаратом теорії функціонала електронної густини та доведення основних теорем;</li> <li>✓ оволодіння базовими методами квантової хімії для опису структурних та термодинамічних характеристик матеріалів;</li> <li>✓ отримання практичних навичок роботи із сучасними програмними пакетами, на базі яких реалізовано розрахунки властивостей матеріалів методом функціоналу електронної густини;</li> </ul>	

✓ короткий екскурс в історію виникнення і розвитку теорії функціонала електронної густини.					
<b>4. Компетентності</b>					
ЗК04. Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації з різних джерел. ЗК10. Здатність розробляти та управляти науковими проектами в умовах обмеженого часу та ресурсів. ФК01. Здатність виконувати оригінальні дослідження в експериментальній та теоретичній фізиці, досягати наукових результатів, які створюють нові знання, із звертанням особливої уваги до актуальних проблем та використанням новітніх наукових методів ФК05. Здатності у використанні наукового обладнання та технологій.					
<b>5. Результати навчання</b>					
ПРН05. Готувати і виконувати експериментальні, теоретичні дослідження в галузі фізики та дотичних міждисциплінарних напрямів з використанням сучасних інструментів, критично аналізувати результати власних досліджень і результати інших дослідників у контексті усього комплексу сучасних знань щодо досліджуваної проблеми. ПРН07. Реалізовувати наукові проекти, для переосмислення наявного та створення нового цілісного знання. ПРН10. Використовувати знання про взаємозв'язок кристалічної структури з фізичними і хімічними властивостями в ході створення нових перспективних матеріалів оптоелектроніки та термоелектрики.					
<b>6. Організація навчання курсу</b>					
Обсяг навчальної дисципліни 90 год.					
Вид заняття	Загальна кількість годин				
лекції	14 год				
семінарські заняття / практичні / лабораторні	16 год				
самостійна робота	60 год				
Ознаки курсу					
Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / вибірковий		
<b>3</b>	<b>104 Фізика та астрономія</b>	2	вибірковий		
Тематика курсу					
Тема, план	Форма заняття	Література	Завдання, год	Вага оцінки	Термін виконання
Тема 1. Матеріали для застосувань в енергетиці: вимоги та сучасні тренди. Об'ємні, тонкоплівкові та наноматеріали. Нанорозмірний фактор в матеріалознавстві. Специфіка наноматеріалів та нанотехнологій.	Лекція, практичне заняття	[1, 2, 3, 4, 10, 11, ]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом

Тема 2. Наноструктури і нанотехнології. Моделювання наноструктур. Особливості нанорозмірного стану речовини. Розмірні та квантово-розмірні ефекти. Класифікація та характеристики наноматеріалів в енергетиці.	Лекція, практичне заняття	[1, 3, 8, 15]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 3. Структура наноматеріалів. Структурні особливості наноматеріалів. Дефекти, межі зерен, інтерфейси, включення фаз. Структурні методи дослідження наноматеріалів.	Лекція, практичне заняття	[2, 3, 8, 11]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 4. Матеріали для термоелектрики: класифікація матеріалів, сучасні тренди розвитку досліджень у термоелектричному матеріалознавстві. Низько-температурні матеріали для термоелектрики. Термоелектричні холодильні пристрої.	Лекція, практичне заняття	[1, 8, 12, 13, 14]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 5. Генераторні термоелектричні матеріали. Середньотемпературні матеріали на основі сполук IV-VI. Скутерудити. Клатрати. Zintl фази. Високотемпературні матеріали Si-Ge для застосувань у космосі	Лекція, практичне заняття	[26, 27, 28, 30]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом
Тема 6. Фотоелектричні матеріали: вимоги, класифікація. Об'ємні фотоелектричні матеріали.	Лекція, практичне заняття	[26, 29]	Опрацювати лекційний матеріал, підготуватися до практичного заняття	10	До наступного заняття за розкладом

Тема 7. Плівкові термоелектричні матеріали. Фотосинтез білізовані матеріали. Моделювання характеристик фотоелектричних матеріалів. SCAPS симуляції.	Лекція, практичне заняття	[6, 7, 8, 9, 10]			До наступного заняття за розкладом
Тема 8. Матеріали для накопичення енергії. Вуглецеві нанопористі матеріали. Графен, МХени, вуглецеві нанотрубки,	Лекція, практичне заняття	[6, 7, 8, 9, 10]			До наступного заняття за розкладом
Підсумкове заняття	Підсумкова робота			30	

### 7. Система оцінювання курсу

Загальна система оцінювання курсу	<p><b>100 бална:</b> Підсумкова оцінка виставляється за результатами виступу на семінарі (<b>60 балів</b>). Та <b>40 балів</b> – оцінюється виконання тестів у системі дистанційного навчання. Для виступу на семінарі пропонуються тематики до обговорення</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Завдання: «Методи мінімізації теплопровідності термоелектричних матеріалів» - <b>10 балів</b>.</li> <li>- Завдання: «SCAPS модулювання фотоелектричних матеріалів та систем» - <b>20 балів</b>.</li> <li>- Завдання «Особливості впливу поверхні на термоелектричні та фотоелектричні характеристики матеріалів» - <b>20 балів</b>.</li> <li>- Завдання «Дослідження структури: аналіз SEM, EDS, EDX, TEM досліджень» - <b>10 балів</b>.</li> </ul> <p>Деякі теми можуть поєднуватися (замінятися) із тестами у системі дистанційного навчання. Кількість балів за тести еквівалентна кількості балів за практичну роботу.</p> <p><b>Зараховано-“відмінно”</b> – студент демонструє повні і глибокі знання навчального матеріалу, достовірний рівень розвитку умінь та навичок, правильне й обґрунтоване формулювання практичних висновків, наводить повний обґрунтований розв’язок прикладів та задач, аналізує причинно-наслідкові зв’язки; вільно володіє науковими термінами;</p> <p><b>Зараховано-“добре”</b> – студент демонструє повні знання навчального матеріалу, але допускає незначні пропуски фактичного матеріалу, вміє застосувати його до розв’язання конкретних прикладів та задач, у деяких випадках нечітко формулює загалом правильні відповіді, допускає окремі несуттєві помилки та неточності розв’язках;</p> <p><b>Зараховано-“задовільно”</b> – студент володіє більшою частиною фактичного матеріалу, але викладає його не досить послідовно і логічно, допускає істотні пропуски у</p>
-----------------------------------	--

	<p>відповіді, не завжди вміє правильно застосувати набуті знання до розв'язання конкретних прикладів та задач, нечітко, а інколи й невірно формулює основні твердження та причинно-наслідкові зв'язки;  <b>Незараховано</b> – студент не володіє достатнім рівнем необхідних знань, умінь, навичок, науковими термінами/</p>
Вимоги до практичної роботи	<p>Практичне заняття проводиться з метою формування у аспірантів практичних умінь і навичок з предмету, формулювання та вирішення прикладних завдань, їх перевірка та оцінювання. За метою і структурою практичні заняття є ланцюжком, який пов'язує теоретичне навчання і навчальну практику з дисципліни, а також передбачає попередній контроль знань. Оцінка за кожне практичне заняття підсумовується і враховується при виставленні підсумкової оцінки з дисципліни.          Практичні завдання виконуються із використанням прикладних програмних пакетів GAMESS US (відкритий код), Bugarі (відкритий код), Wien 2k (наявна комерційна версія) та програмах обробки / аналізу розрахованих значень (Avogadro, Chemcraft, GaussSum, Molden, Xcrysden тощо – із відкритим кодом для академічного застосування).</p>
Умови допуску до підсумкового контролю	

### 8. Політика курсу

- самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання (для осіб з особливими освітніми потребами ця вимога застосовується з урахуванням їхніх індивідуальних потреб і можливостей);  
 - посилання на джерела інформації у разі використання ідей, розробок, тверджень, відомостей;  
 - надання достовірної інформації про результати власної навчальної (наукової, творчої) діяльності, використані методики досліджень і джерела інформації».

Засвоєння пропущеної теми лекції з поважної причини перевіряється під час складання підсумкового контролю. Пропуск лекції з неповажної причини відпрацьовується студентом відповідно вимог (опрацювання робочого матеріалу, виконання тестових завдань у системі дистанційного оцінювання знань, тощо).

Поточні негативні бали, отримані аспірантом під час засвоєння відповідної теми на практичному занятті перескладаються до складання підсумкового контролю з обов'язковою відміткою у журналі обліку роботи академічних груп.

### 9. Рекомендована література

1. Li, Z., Xiao, C., Zhu, H., & Xie, Y. (2016). Defect chemistry for thermoelectric materials. *Journal of the American Chemical Society*, 138(45), 14810-14819.
2. Sootsman, J. R., Chung, D. Y., & Kanatzidis, M. G. (2009). New and old concepts in thermoelectric materials. *Angewandte Chemie International Edition*, 48(46), 8616-8639.
3. Фреїк, Д.М. Досягнення і проблеми термоелектрики: Історичні аспекти (Огляд) / Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, О.С. Криницький // *Фізика і хімія твердого тіла* – Т. 13, № 2 (2012). С. 297–318.
4. Zaferani, S. H., Sams, M. W., Ghomashchi, R., & Chen, Z. G. (2021). Thermoelectric Coolers as Thermal Management Systems for Medical Applications: Design, Optimization, and Advancement. *Nano Energy*, 106572.
5. Zapukhlyak, Z. R., Nykyruy, L. I., Wisz, G., Rubish, V. M., Prokopiv, V. V., Halushchak, M. O., ... & Yavorskyi, R. S. (2020). SCAPS modelling of ZnO/CdS/CdTe/CuO photovoltaic heterosystem. *Physics and Chemistry of Solid State*, 21(4), 660-668.

6. B.K. Ghosh, I. Saad, K.T.K. Teo, and S.K. Ghosh, mcSi and CdTe solar photovoltaic challenges: Pathways to progress, *Optik* 206, 164278 (2020) (<https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.164278>).
7. G. Wisz, L.I. Nykyruy, V.M. Yakubiv, I.I. Hryhoruk, R.S. Yavorskyi, Impact of advanced research on development of renewable energy policy: case of Ukraine, *International Journal of Renewable Energy Research* 8(4), 2367-2384 (2018)
8. Nykyruy L., Yakubiv V., Wisz G., Hryhoruk I., Zapukhlyak Z., Yavorskyi R.. Book title: Renewable Energy - Resources, Challenges and Applications. Chapter title: Energy policy at the EU – non-EU border: critical analysis, opportunities and improve for the future. edited by Dr. Mansour Al Qubeissi. InTechOpen. London. ISBN 978-1-78984-284-5. DOI:10.5772/intechopen.91686
9. S.G. Kumar, K.K. Rao, Physics and chemistry of CdTe/CdS thin film heterojunction photovoltaic devices: fundamental and critical aspects, *Energy & Environmental Science* 7(1), 45-102 (2014) (<https://doi.org/10.1039/C3EE41981A>).
10. M.A. Green, E.D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, X. Hao, Solar cell efficiency tables (version 56), *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 28(7), 629-638 (2020) (<https://doi.org/10.1002/pip.3303>).
11. M. Burgelman, J. Verschraegen, S. Degrave, P. Nollet, Modeling thin-film PV devices, *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* 12(2-3), 143–153, (2004) (<https://doi.org/10.1002/pip.524>).
12. M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, Modelling polycrystalline semiconductor solar cells, *Thin Solid Films* 361, 527–532 (2000) ([https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00825-1](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00825-1)).
13. Наноматеріали і нанотехнології: навчальний посібник / Азаренков М. О., Неклюдов І. М., Береснев В. М., Воеводін В. М., Погребняк О. Д., Ковтун Г. П., Соболев О. В., Удовиський В. Г., Литовченко С. В., Турбін П. В., Чишкала В. О. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2014. – 316 с.
14. Основи наноелектроніки: у 2 кн. Кн.2 «Матеріали і наноелектронні технології : Підручник / Ю.І. Якименко, Д.М. Заячук, В. М.Співак, А.Т. Орлов, О. В. Богдан, В.М. Коваль. – сайт <http://www.fel.ntukpi.kiev.ua>. – К: НТУУ «КПІ», 2016. - 400 с.
15. Поплавко Ю.М., Борисов О. В., Якименко Ю. І. Нанофізика, наноматеріали, наноелектроніка: навч. посіб. – К.: НТУУ «КПІ», 2012. – 300 с.
16. Maksymuk, M., Parashchuk, T., Dzundza, B., Nykyruy, L., Chernyak, L., & Dashevsky, Z. (2021). Highly efficient bismuth telluride-based thermoelectric microconverters. *Materials Today Energy*, 21, 100753, <https://doi.org/10.1016/j.mtener.2021.100753>
17. Naidych, B., Parashchuk, T., Yaremiy, I., Moysenchenko, M., Kostyuk, O., Voznyak, O., ... & Nykyruy, L. (2021). Structural and Thermodynamic Properties of Pb-Cd-Te Thin Films: Experimental Study and DFT Analysis. *Journal of Electronic Materials*, 50(2), 580-591, <https://doi.org/10.1007/s11664-020-08561-5>
18. Dzundza, B., Nykyruy, L., Parashchuk, T., Ivakin, E., Yavorsky, Y., Chernyak, L., & Dashevsky, Z. (2020). Transport and thermoelectric performance of n-type PbTe films. *Physica B: Condensed Matter*, 588, 412178, <https://doi.org/10.1016/j.physb.2020.412178>
19. Л.І. Никируй, О.В. Замуруєва, В.С. Федосов, О.М. Бірук, С.А. Федосов Науково-технічний прогрес розвитку відновлюваної енергетики в Україні, Міжвузівський збірник наукових праць (за галузями знань «Фізико-математичні науки» та «Технічні науки»), випуск 70, сс. 18-26, 2020, <https://doi.org/10.36910/6775.24153966.2020.70.3>
20. Никируй Л. І., Замуруєва О. В., Новосад О. В., Федосов С. А. Перспективні матеріали і технології сонячних елементів. *Perspective Technologies and Devices – Перспективні технології та прилади*. 2020. № 17. С. 175–182, <https://doi.org/10.36910/6775-2313-5352-2020-17-26>

Викладач



Никируй Л.І.